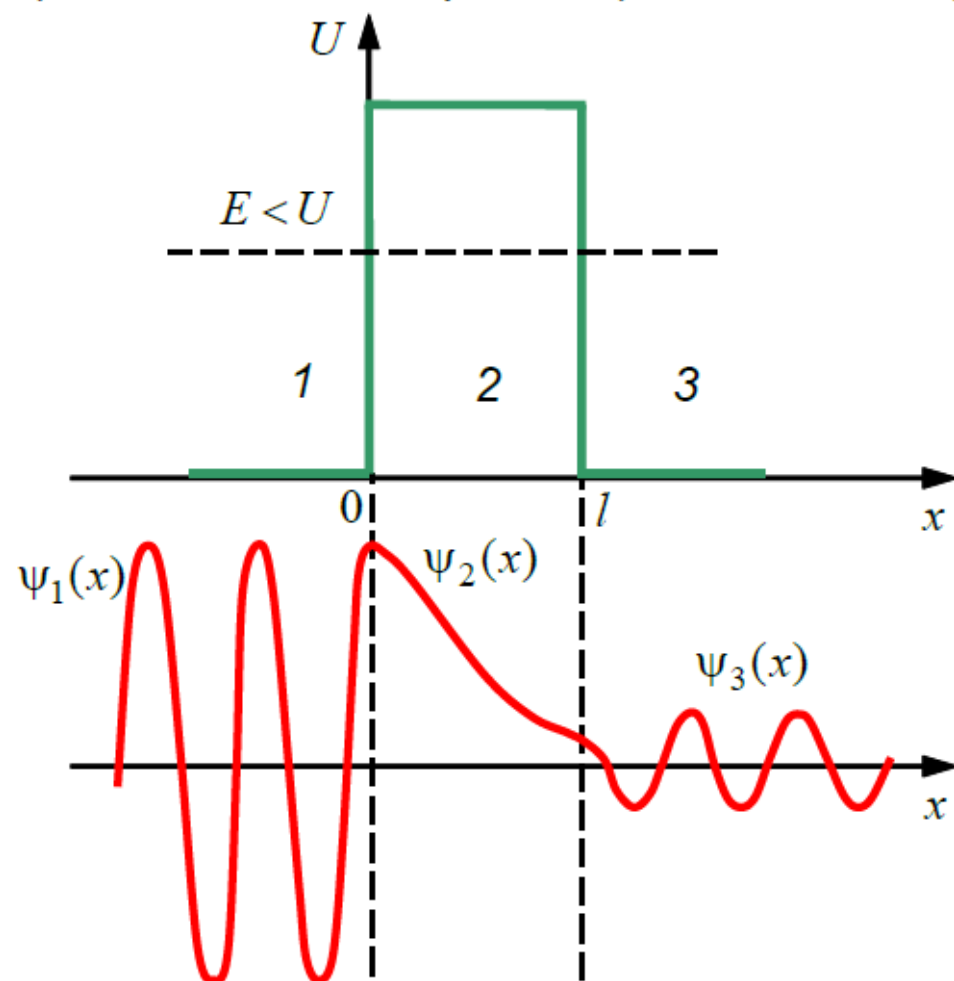


Лекция 6
06 октября 2026 года

Прохождение частицы через потенциальный барьер. Туннельный эффект

Рассмотрим простейший потенциальный барьер прямоугольной формы (высота U и ширина l) для одномерного движения частицы:



$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 & (\text{область 1}) \\ U, & 0 \leq x \leq l & (\text{область 2}) \\ 0, & x > l & (\text{область 3}) \end{cases}$$

Вид волновых функций, являющихся решениями уравнения Шредингера для областей 1, 2 и 3 (см. рисунок и таблицу) свидетельствует о том, что:

1) **В области 1** волновая функция представляет собой сумму двух плоских волн – движущейся в сторону барьера и отражённой от барьера.

2) **В области 2** в случае $E < U$:

$$q = i\beta, \quad \text{где } \beta = \frac{\sqrt{2m(U - E)}}{\hbar}.$$

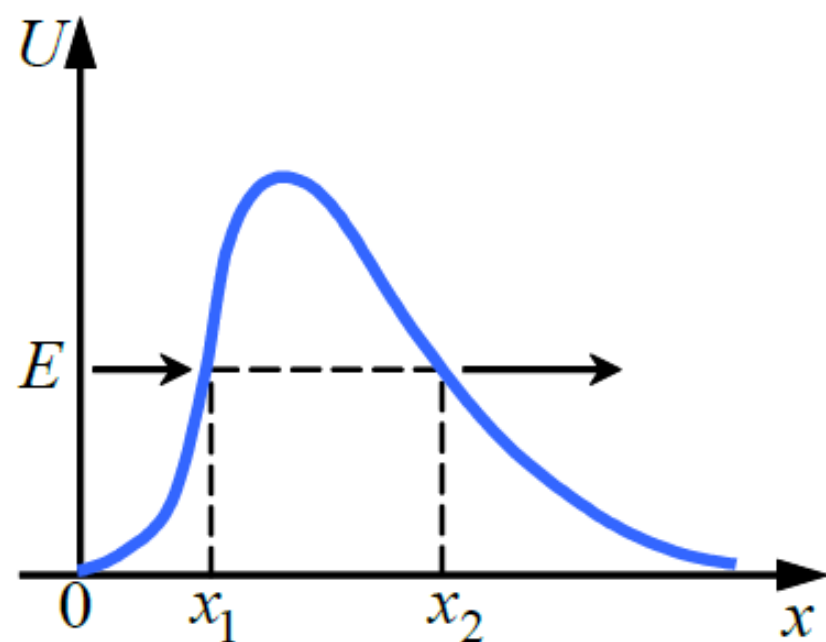
3) В области 3 имеется только волна, прошедшая через барьер ($B_3 = 0$), которая имеет вид волн де Бройля с той же длиной волны, но меньшей амплитудой.

Об- ласть	Уравнение Шредингера	Общее решение	Решение при $E < U$
1	$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k^2 \psi_1 = 0,$	$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$	$\psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}$
2	$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + q^2 \psi_2 = 0,$	$\psi_2(x) = A_2 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx}$	$\psi_2(x) = A_2 e^{-\beta x} + B_2 e^{\beta x}$
3	$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + k^2 \psi_2 = 0,$	$\psi_3(x) = A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}$	$\psi_3(x) = A_3 e^{ikx}$

Здесь $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $q^2 = \frac{2m(E - U)}{\hbar^2}$.

Таким образом, квантовая механика приводит к принципиально новому специфическому квантовому явлению, получившему название **туннельного эффекта**, в результате которого микрообъект может "пройти" сквозь потенциальный барьер.

Для описания туннельного эффекта используют понятие **коэффициента прозрачности** D потенциального барьера, определяемого как отношение квадратов модулей прошедшей и падающей волны. Для случая **прямоугольного** потенциального барьера:



$$D = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = D_0 \exp\left(-\frac{2l}{\hbar} \sqrt{2m(U - E)}\right).$$

Для потенциального барьера произвольной формы:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx\right).$$

Прохождение частицы сквозь область, в которую, согласно законам классической механики, она не может проникнуть, можно пояснить *соотношением неопределённостей*. Неопределённость импульса Δp на отрезке $\Delta x = l$ составляет $\Delta p > h/l$. Связанная с этим разбросом в значениях импульса кинетическая энергия $\frac{(\Delta p)^2}{2m}$ может оказаться достаточной для того, чтобы полная энергия частицы оказалась больше потенциальной.

Линейный гармонический осциллятор в квантовой механике

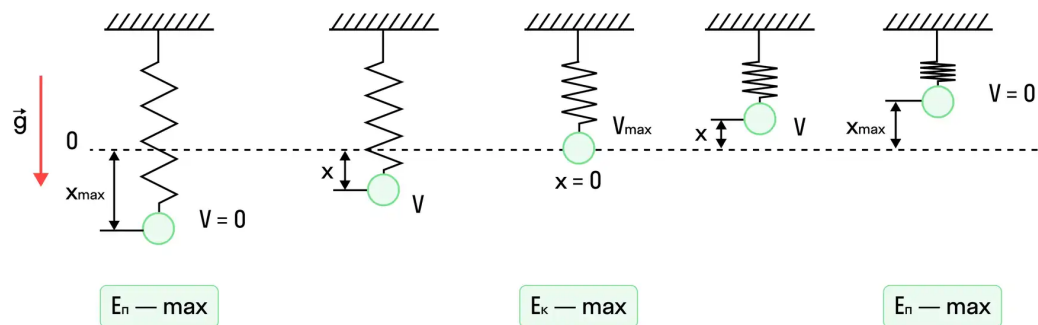
Линейный гармонический осциллятор – система, совершающая одномерное движение под действием квазиупругой силы, является моделью, которая часто используется при описании классических и квантовых систем.

Пружинный, физический и математический маятники – примеры классических гармонических осцилляторов.

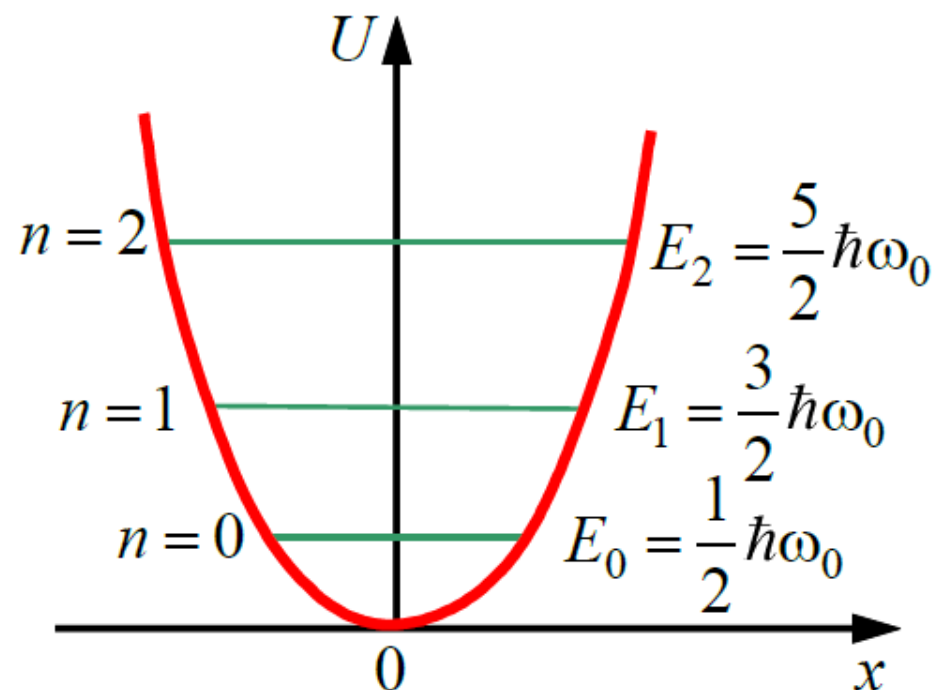
Потенциальная энергия гармонического осциллятора равна: $U = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}$,

где ω_0 – собственная частота колебаний осциллятора, m – масса частицы.

Классический осциллятор не может выйти за пределы "потенциальной ямы" с координатами $-x_{\max} \leq x \leq +x_{\max}$.



Уравнение Шредингера для стационарных состояний квантового осциллятора:



$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \right) \cdot \psi = 0,$$

где E – полная энергия осциллятора.

Собственные значения энергии для этого уравнения:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0 \quad (n = 0, 1, 2, \dots).$$

Таким образом, энергия квантового осциллятора **квантуется** (может иметь лишь дискретные значения). Уровни энергии расположены на **одинаковых** расстояниях, равных $\hbar \omega_0$.

Минимальная энергия $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0$ называется **энергией нулевых колебаний**.

Существование энергии нулевых колебаний – типично квантовый эффект – прямое следствие соотношения неопределённостей.

Частица в яме любой формы не может находиться на её дне, поскольку в нуль обращается импульс частицы и его неопределённость, а неопределённость координаты становится бесконечной, что противоречит, в свою очередь, условию пребывания частицы в "потенциальной яме".

Правилами отбора в квантовой механике называются условия, накладываемые на изменения квантовых чисел.

Для гармонического осциллятора возможны лишь переходы между соседними подуровнями, т. е. переходы, удовлетворяющие **правилу отбора**:

$$\Delta n = \pm 1.$$

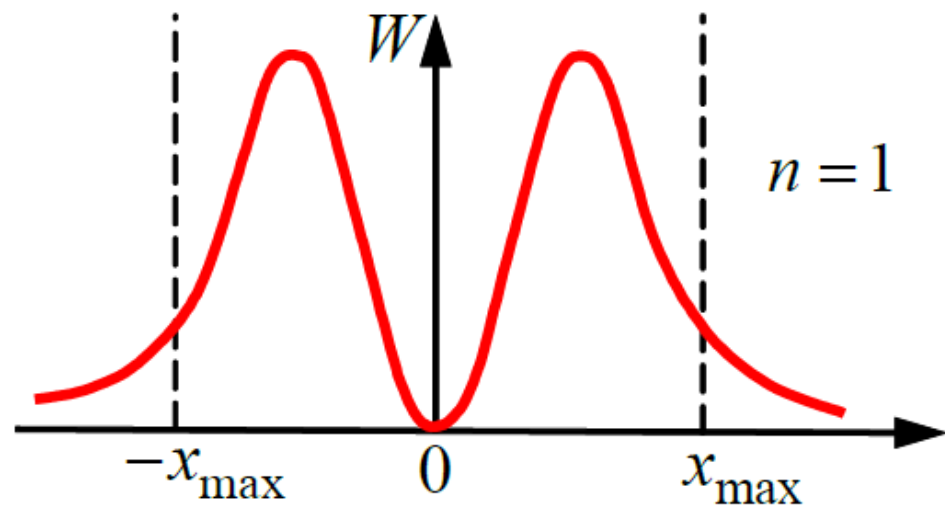
Следовательно, энергия гармонического осциллятора может изменяться только порциями $\hbar\omega$, и гармонический осциллятор испускает и поглощает энергию квантами.

Квантово-механическое решение задачи о квантовом осцилляторе показывает, что *имеется* отличная от нуля вероятность обнаружить частицу за пределами области:

$$-x_{\max} \leq x \leq +x_{\max}.$$

На рисунке приведена квантовая плотность вероятности обнаружения осциллятора при $n = 1$, имеющая конечные значения для:

$$x \geq x_{\max}.$$

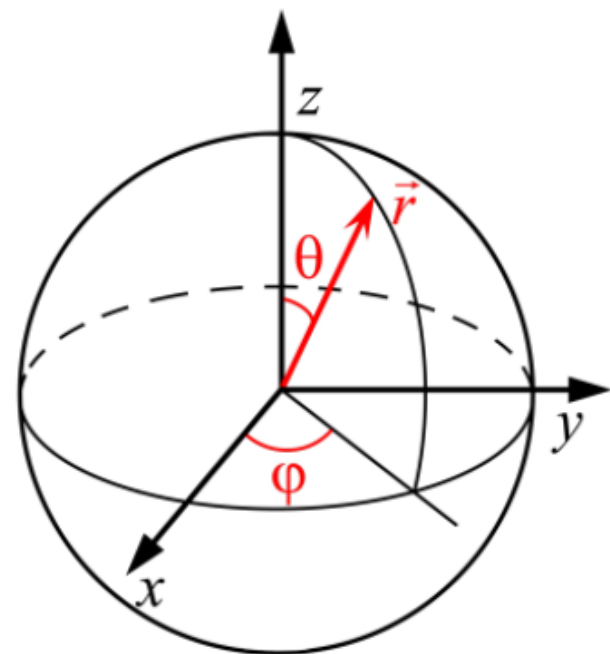


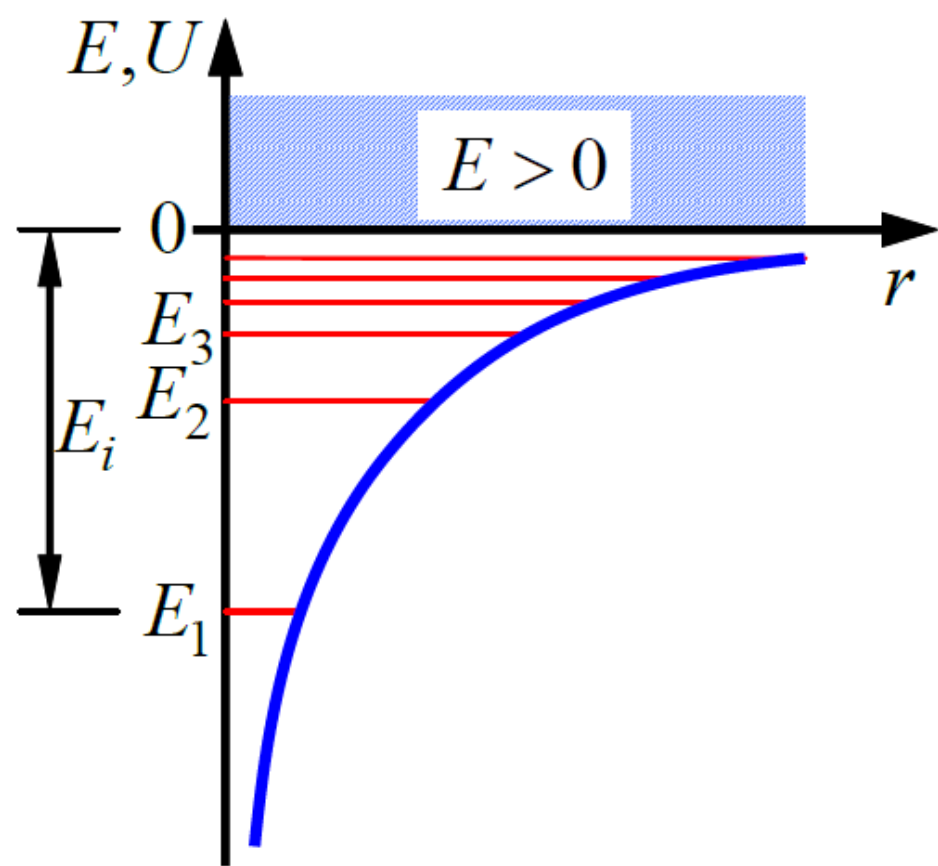
Атом водорода в квантовой механике

На примере водородоподобных атомов – простейших атомов, содержащих единственный внешний электрон, – рассмотрим основы систематики квантовых состояний атомов. Поле водородоподобного атома – это пример **центрального** поля. В таком поле удобно использовать **сферическую** систему координат: r , θ , φ .

Потенциальная энергия кулоновского взаимодействия электрона с атомным ядром, обладающим зарядом Ze (для атома водорода $Z = 1$):

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$





$$U(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

где r – расстояние между электроном и ядром.
Стационарное уравнение Шредингера:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0$$

только при собственных значениях энергии

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{Z^2 m e^4}{8 h^2 \epsilon_0^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

(т.е. для *дискретного* набора отрицательных энергий (**квантование энергии**)) имеет решения, удовлетворяющие требованиям *однозначности*, *конечности* и *непрерывности* волновой функции $\psi(r, \theta, \varphi)$.

Выражение для E_n совпадает с полученным в теории атома Бора.

Нижайший уровень E_1 – **основной**, все остальные – **возбуждённые**.

При $E < 0$ движение электрона – **связанное**, при $E > 0$ – **свободное** (атом **ионизуется**).

Энергия $E = E_\infty = 0$ достигается при $n = \infty$.

Энергия ионизации атома **водорода**: $E_i = -E_1 = \frac{me^4}{8h^2\varepsilon_0^2} = 13,55 \text{ эВ}$.

Собственные волновые функции $\psi = \psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ определяются тремя **квантовыми числами**: **главным** n , **орбитальным** l и **магнитным** m .

Квантовые числа

- Главное квантовое число n определяет **энергетические уровни электрона** в атоме:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

- Орбитальное квантовое число l при заданном n принимает значения:

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

и определяет величину **момента импульса (механический орбитальный момент)** электрона в атоме:

$$L_l = \hbar \sqrt{l(l+1)}.$$

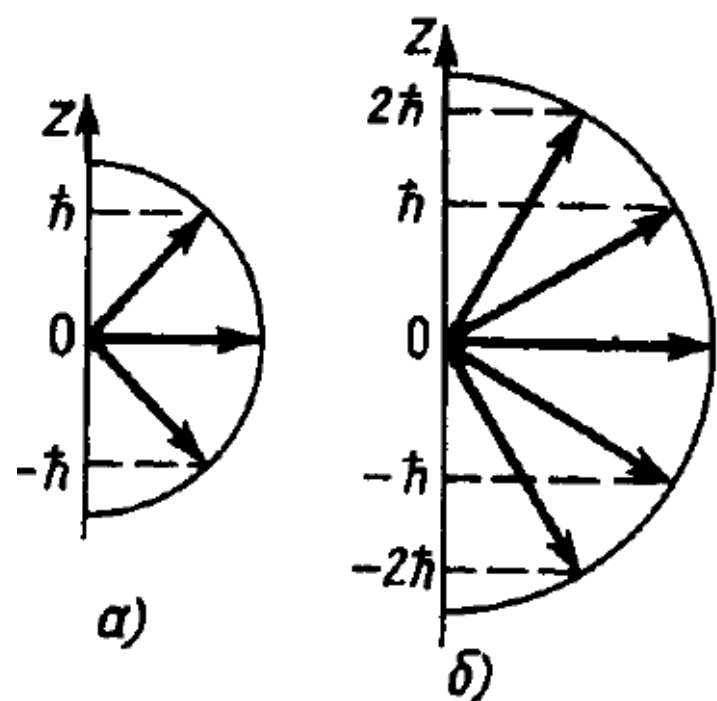
— **Магнитное квантовое число** m при данном l принимает значения:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

и определяет **величину** момента импульса электрона в заданном направлении. Так орбитальный момент импульса электрона $\vec{L}_l$ может иметь *лишь* такие ориентации в пространстве, при которых **проекция** L_{lz} вектора $\vec{L}_l$ на направление внешнего магнитного поля принимает только квантованные значения, кратные $\hbar$ (**пространственное квантование**):

$$L_{lz} = m\hbar.$$

—



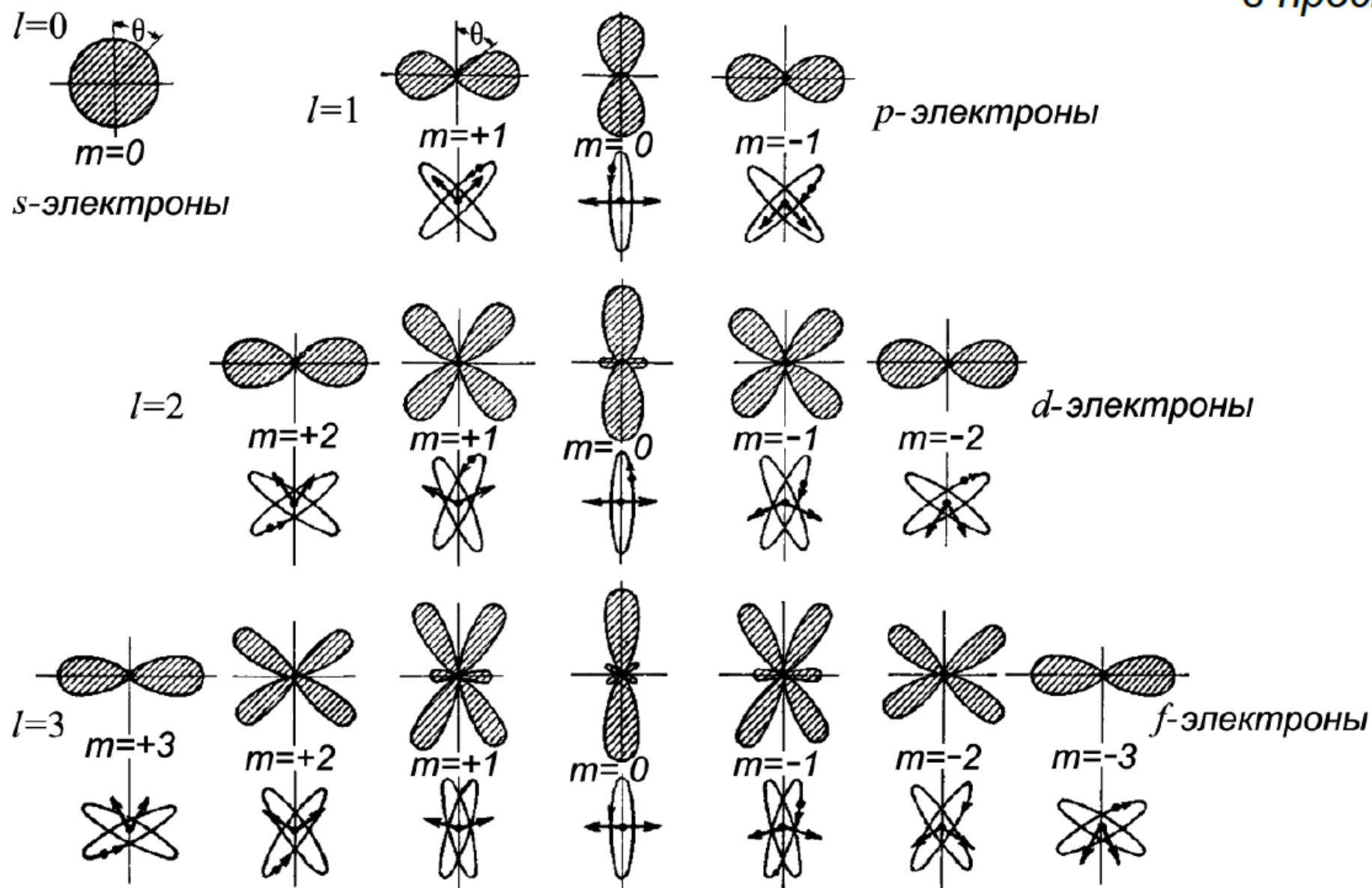
Таким образом, вектор $\vec{L}_l$ может принимать $2l + 1$ ориентаций в пространстве. На рисунке приведены возможные ориентации векторов $\vec{L}_l$ для электронов с $l = 1$ (а) и $l = 2$ (б).

Соответственно, в **магнитном** поле уровень с главным квантовым числом n расщепляется на $2l + 1$ подуровней – **эффект Зеемана**.

Расщепление уровней энергии во внешнем **электрическом** поле называется **эффектом Штарка**.

В квантовой механике *квадрат модуля волновой функции* определяет *вероятность* обнаружения электрона в единице объёма. Вероятность обнаружения электрона в разных частях атома различна. Электрон при своём движении как бы "размазан" по всему объёму, образуя *электронное облако*, плотность (густота) которого характеризует вероятность нахождения электрона в различных точках объёма атома.

Квантовые числа n и l характеризуют размер и форму электронного облака, а квантовое число m характеризует ориентацию электронного облака в пространстве.



В атомной физике, по аналогии со спектроскопией, состояние электрона, характеризующееся квантовым числом $l = 0$, называется s – состоянием (электрон в этом состоянии называется s – электроном); $l = 1$ – p – состоянием; $l = 2$ – d – состоянием; $l = 3$ – f – состоянием и т. д.

На рисунке показаны **графические изображения** (полярные диаграммы) плотностей вероятности для s -, p -, d - и f - электронов и соответствующее каждому случаю **пространственное квантование** – такая ориентация боровских орбит, при которой проекция момента импульса имеет соответствующее значение (например, $\pm 2\hbar$ для $l = 2$, $m = 2$).

Правила отбора

Переходы между электронными состояниями возможны только в том случае, если:

- 1) изменение Δl орбитального квантового числа l удовлетворяет условию

$$\Delta l = \pm 1;$$

- 2) изменение Δm магнитного квантового числа m удовлетворяет условию

$$\Delta m = 0, \pm 1.$$

Так, например, в атоме водорода переходы $np \rightarrow 1s$ ($n = 2, 3, \dots$) образуют серию Лаймана, а переходы $np \rightarrow 2s$, $ns \rightarrow 2p$, $nd \rightarrow 2p$ ($n = 3, 4, \dots$) – серию Бальмера.

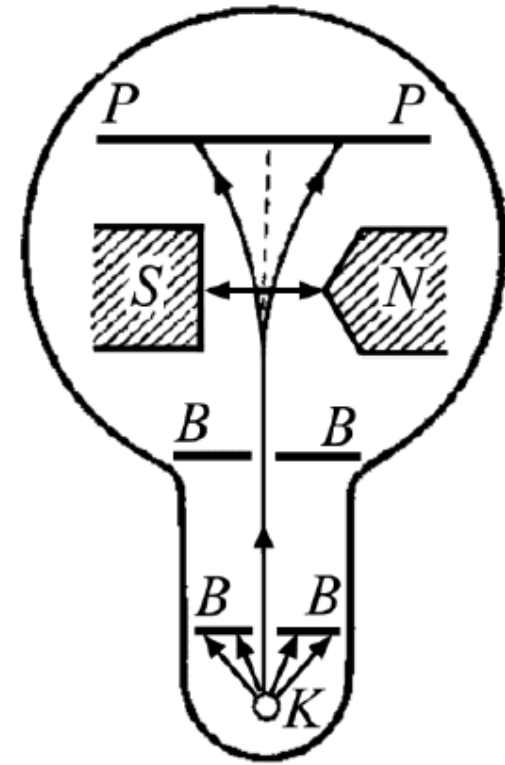
Спин электрона

Электрон обладает **собственным неуничтожимым механическим моментом импульса**, не связанным с движением электрона в пространстве, – **спином**.

Спин был обнаружен в экспериментах *Штерна и Герлаха* при прохождении узкого пучка атомов водорода, находящихся в s -состоянии через сильное неоднородное магнитное поле. В этом состоянии $l = 0$, момент импульса $L_0 = \hbar\sqrt{l(l+1)} = 0$, и магнитное поле не должно было влиять на движение атомов. Однако пучок атомов *расщеплялся на два пучка*, следовательно, было обнаружено пространственное квантование механического момента, не связанного с орбитальным движением электрона.

Часто спин электрона *наглядно* представляют, как момент импульса, связанный с вращением электрона – твёрдого шарика – вокруг своей оси, **НО** такая модель приводит к *абсурдному* результату – линейная скорость на поверхности электрона в 200 раз превышает скорость света.

Поэтому *следует рассматривать спин электрона* (и всех других микрочастиц) **как внутреннее неотъемлемое квантовое свойство микрочастицы**: подобно тому, как частицы имеют массу, а заряженные частицы – заряд, они имеют ещё и **СПИН**.



Спин $\vec{L}_s$, как механический момент, квантуется по закону

$$L_s = \hbar \sqrt{s(s+1)},$$

где s – **спиновое квантовое число**. Проекция L_{sz} спина квантуется так, что вектор $\vec{L}_s$ может принимать $2s+1$ ориентаций. Так как опыты Штерна и Герлаха обнаружили только две ориентации спина, то $2s+1=2$, откуда: $s = \frac{1}{2}$.

Проекция $L_{sz} = \hbar m_s$, где m_s – **магнитное спиновое квантовое число**, которое может иметь только два значения: $m_s = \pm \frac{1}{2}$.

Таким образом, состояние электрона в атоме определяется набором **четырёх** квантовых чисел:

- | | | | |
|-----|--------------------|-------|--|
| (1) | главное | n | $(n = 1, 2, 3, \dots);$ |
| (2) | орбитальное | l | $(l = 0, 1, 2, \dots, n-1);$ |
| (3) | магнитное | m | $(m = -l, \dots, -1, 0, +1, \dots, +l);$ |
| (4) | магнитное спиновое | m_s | $(m_s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}).$ |